

タンパク質の電子状態計算
Electronic state calculation of proteins

東京大学 生産技術研究所 機械・生体系部門 平野 敏行

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して、タンパク質の電子状態計算を行い、計算化学的手法によりタンパク質の物性・反応性を理解することを目的としている。使用するプログラムは自らが開発している量子化学計算プログラム ProteinDF である。ProteinDF は計算領域を分割することなく、金属を含むタンパク質のカノニカル分子軌道計算を達成できる点が特長である。ProteinDF はオブジェクト指向言語 C++で記述され、MPI/OpenMP によるハイブリッド並列計算を行うことができる。

タンパク質の電子状態計算を達成するためには、高精度な初期値を作成することも重要である。そこで擬カノニカル局在化軌道(QCLO)法を利用した自動計算 Python プログラム QCLObot を開発している。QCLObot では、YAML フォーマットで用意した計算シナリオに基づき、適宜サブユニットの作成・末端処理を行い、サブユニットの QCLO を作成・再構築して巨大分子の電子状態計算を達成することができる。最近では、PDB から得られたタンパク質構造から、水素付加や構造緩和を行い、量子化学計算に耐えうる分子構造のモデリングを行う機能も追加した。

本年度は、計算環境の準備・構築に加え、相互作用解析ツールの開発およびテスト計算を行った。EDA 法に基づく相互作用エネルギー解析ツールを ProteinDF および QCLObot に実装した。grid-free 法を用いることにより、密度汎関数法における交換相関エネルギー成分を算出できることが特長である。アミノ酸残基や主鎖・側鎖ごとの相互作用エネルギーを算出し、得られた相互作用エネルギーをヒートマップにより可視化するようにした。低分子および小規模タンパク質の電子状態計算を行い、デバッグ・テスト計算を行った。今後、様々なタンパク質の相互作用エネルギー解析計算を行い、有用性を確かめていきたい。